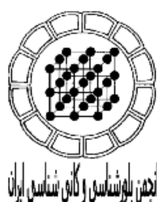
مجله بلورشناسی و کانی شناسی ایران

سال بیست و هفتم، شمارهٔ دوم، تابستان ۹۸، از صفحهٔ ۴۵۹ تا ۴۶۶



سنتز و ساختار بلوری ترکیب آدنینیوم بیس (پیریدین-۲،۶-دی‌کربوکسیلاتو) کرومات (III)، پیریدین-۲،۶-دی‌کربوکسیلیک اسید تتراهیدرات

ماکان اتفاق[۱,۲]، ژانت سلیمان‌نژاد*[۱]، سیما صدقی‌نیا[۱]، کلودیا گرایف[۳]

۱- دانشکده شیمی، پردیس علوم، دانشگاه تهران، تهران

۲- دانشکده شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

۳- دانشکده شیمی، علوم زیستی و پایداری زیست محیطی، دانشگاه پارما، ایتالیا

(دریافت مقاله: ۹۷/۵/۱۰، نسخه نهایی: ۹۷/۸/۹)

چکیده: در این پژوهش، ترکیب سوپرامولکولی جدید آدنینیوم بیس(پیریدین-۲،۶-دی‌کربوکسیلاتو) کرومات (III) پیریدین-۲،۶-دی-کربوکسیلیک اسید تترا هیدرات $(AdH^+)[Cr(pydc)_2](H_2pydc).4H_2O$ (**۱**) که Ad و H_2pydc به ترتیب لیگاندهای آدنین و پیریدین-۲،۶-دی کربوکسیلیک اسید هستند، به روش انتقال پروتون سنتز و ساختار بلوری آن به وسیله‌ی تکنیک بلورشناسی با پرتو X تعیین شد. این ترکیب در سیستم بلوری راستگوشی و گروه فضایی *Pbca* متبلور شده است و پارامترهای یاخته یکه آن a=۱۴٫۱۸۰ (۱۴)، b=۱۳٫۰۳۶ (۱۲) c=۳۳٫۹۸ (۳) آنگستروم و زوایا ۹۰ درجه هستند. مقدار R نهایی برای ۲۵۲۳ بازتاب مستقل ۰٫۰۵۳ است. واحد بی‌تقارن از سه جزء آنیونی و کاتیونی و خنثی تشکیل شده است. جزء آنیونی کمپلکسی از یون Cr(III) و دو واحد پیریدین-۲،۶-دی‌کربوکسیلات و جزء کاتیونی یک مولکول آدنین پروتونه است. جزء خنثی یک واحد مولکول پیریدین-۲،۶-دی-کربوکسیلیک اسید است و چهار واحد مولکول آب تبلور نیز وجود دارد. هر کمپلکس فلزی کروم(III) در ترکیب مورد بررسی دارای آرایش هشت وجهی انحراف یافته در نتیجه اتصال سه دندانه دو لیگاند پیریدین-۲،۶- دی‌کربوکسیلات به فلز مرکزی است. وجود برهم‌کنش‌های بین‌مولکولی و غیرکووالانسی باعث ایجاد ساختارهای خود انباشته منسجم می‌شود. پیوندهای هیدروژنی و انباشتگی $C{=}O\ldots\pi$ از جمله برهم‌کنش‌های بین مولکولی هستند که موجب تشکیل ترکیب سوپرامولکولی بررسی شده‌اند.

واژه‌های کلیدی: *سوپرامولکولی؛ ترکیب‌های انتقال پروتون؛ آدنین؛ پیوندهای هیدروژنی؛ انباشتگی* $C{=}O\ldots\pi$.

مقدمه

شیمی سوپرامولکولی شاخه ای از علم شیمی است که فراتر از ابعاد مولکولی به بررسی سیستم‌های شیمیایی برآمده از انباشت‌های بین‌مولکولی می‌پردازد. در ابعاد مولکولی، اتمها با برقراری پیوندهای کووالانسی باعث بوجود آمدن مولکول‌ها می‌شوند درحالی‌که شیمی سوپرامولکولی توصیف‌کننده ترکیباتی است که مولکول‌ها در اثر انباشت با برقراری برهم‌کنش‌های غیرکووالانسی (بین مولکولی) در کنار یکدیگر چیده می‌شوند [۱-۴]. به‌عبارتی، شیمی سوپرامولکولی مربوط به انباشت خودبه‌خودی ساختارهای مولکولی (مانند انباشت تک‌لایه‌ها در تشکیل غشاء تشخیص مولکولی، پیوند پیش ماده به پروتئین‌ها، برهم‌کنش پروتئین-DNA، برهم‌کنش پادتن- پادگن) توسط نیروهای بین مولکولی به نسبت ضعیف مانند پیوند هیدروژنی، برهم‌کنش واندروالس، آبگریز-آبدوست، نیروهای یونی و برهم‌کنش‌های π-π است [۵].

DNA در ساختار خود دارای دو نوکلئوباز پیریمیدینی به نام‌های سیتوزین و تیمین و دو نوکلئوباز پورینی به نام‌های آدنین و گوانین است. این نوکلئوبازها نقش مهمی را در

*نویسنده مسئول، تلفن: ۰۹۸۲۱۶۶۴۹۵۲۹۱+ پست الکترونیکی: janet_soleimannejad@khayam.ut.ac.ir

[DOI: 10.29252/ijcm.27.2.459]

فرآیندهای زیستی، فعالیت‌های سوخت و سازی و سیگنال‌های گسیل شده از سلول‌ها ایفا می‌کنند [۶]. نوکلئوبازها دارای توانایی برقراری برهم‌کنش‌های متنوع غیرکووالان از قبیل پیوندهای هیدروژنی و برهم‌کنش‌های $\pi-\pi$ هستند. این برهم‌کنش‌ها نه تنها سبب پایداری، بلکه منجر به قابلیت ویژه‌ای در DNA می‌شود که DNA می‌تواند به عنوان یک الگو اطلاعات ژنتیکی را در خود ذخیره کند.

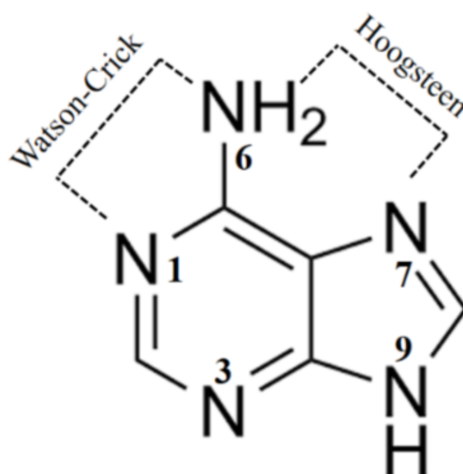
آدنین دارای گروه آمینی خارج حلقه پیریمیدینی و چهار نیتروژن به‌ترتیب در حلقه‌های پیریمیدین (دو نیتروژن) و ایمیدازولی (دو نیتروژن) در ساختار خود است (شکل ۱). پایداری و شکل‌های مختلف توتومری آدنین به عواملی چون pH، دما و حضور یون‌های فلزی بستگی دارد. ترکیب‌هایی مانند آدنین که دارای حلقه نامتجانس هستند به طور طبیعی دارای توانایی برقراری پیوندهای کئوردیناسیونی با فلزهای مختلف و به‌عبارتی نشان دهنده برهم‌کنش میان فلز و نوکلئیک اسیدها نیز خواهند بود [۷]. شیمی کئوردیناسیون آدنین (به هر صورتی شامل آنیون تک ظرفیتی آدنین، آدنین طبیعی، کاتیون تک ظرفیتی آدنین و کاتیون دو ظرفیتی آدنین) به ویژه از وقتی که مشخص شد که این حلقه پورینی در ساختار DNA وجود دارد، مورد توجه قرار گرفته است. افزون بر این، آدنین ممکن است در ساختار داروهای ضد سرطان که حاوی پلاتین و یا دیگر فلزها هستند نیز وجود داشته باشد.

آدنین در همه شکل‌های خود می‌تواند از طریق هر پنج نیتروژن(N1، N3، N6، N7 و N9) خود به فلز کئوردینه شود، اما در این مورد نیتروژن ایمیدازولیN9 ارجحیت دارد. اگرN9 به یک گروه آلکیل و یا ریبوزیل متصل شده باشد، کوئوردینه آدنین به فلز از طریق N7 صورت می‌گیرد و اگر این نیتروژن نیز درگیر پیوند با گروه‌های دیگر باشد آنگاه نیتروژن‌های پس از آن به فلز کئوردینه می‌شوند[۸].

مواد و دستگاه‌ها

همه مواد استفاده شده در این پژوهش با خلوص تجزیه‌ای از شرکت‌مرک خریداری شده و بدون خالص سازی بیشتر به کار رفتند. تجزیه عنصری اتمهای کربن (C)، هیدروژن (H) و نیتروژن (N) با روش CHNS و دستگاه Thermo Finnigan Flash EA 1112 انجام شد و طیف تبدیل فوریه فروسرخ (FT-IR) ترکیب مورد بررسی با دستگاه Bruker Tensor 27 در گستره طول موج cm^{-1} ۴۰۰۰-۶۰۰ با قرص KBr ثبت گردید. داده‌های پراش پرتو X تک بلور با دستگاه پراش سنج Bruker APEX II (با پرتو $Mo-k\alpha$) در دمای اتاق جمع‌آوری شد. ساختار بلوری از "روش مستقیم" تعیین و داده‌های XRD به روش کمینه مربعات کامل ماتریس کامل بر پایه F^2 با نرم افزار SHELXL-2014/7 برازش شد [۹]. برای تهیه تصاویر از نرم افزار مرکوری استفاده شده است [۱۰].

فایل اطلاعات بلورشناسی (cif) در مرکز داده‌های بلورشناسی کمبریج با کد CCDC ۱۸۹۳۱۱۴ به ثبت رسیده و از طریق آدرس www.ccdc.cam.ac.uk/conts/retrieving.html قابل دریافت است.



شکل ۱ ساختار آدنین

[DOI: 10.29252/ijcm.27.2.459]

روش آزمایش

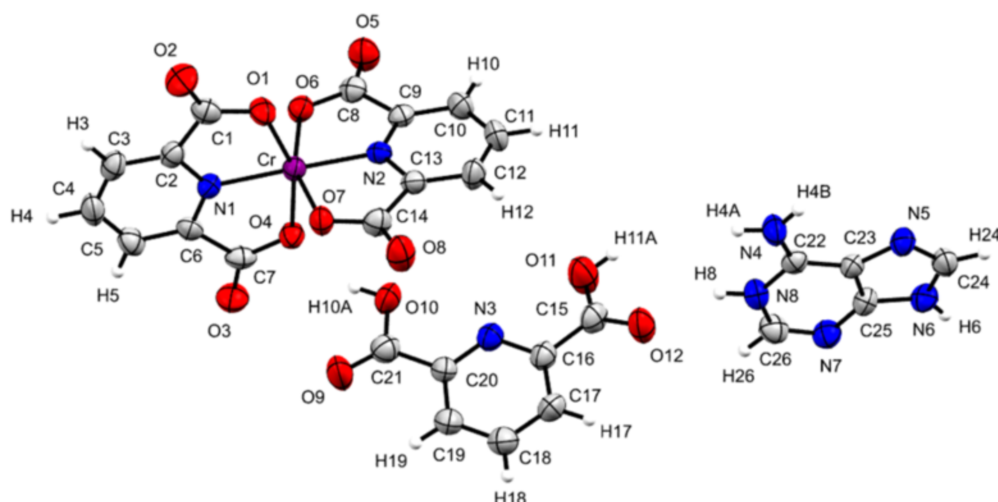
محلول آبی شامل ۰/۲۵ میلی‌مول (۳۴ میلی‌گرم) آدنین و ۰/۵ میلی‌مول (۸۴ میلی‌گرم) پیریدین- ۶،۲- دی‌کربوکسیلیک اسید به مدت یک ساعت در شرایط بازروانی قرار گرفت. سپس ۰/۲۵ میلی‌مول (۶۷ میلی‌گرم) کروم (I) کلرید ۶ آبه به این محلول اضافه شد. که به سرعت رسوب بنفش رنگی به‌دست آمد. محلول صاف شد و محلول زیر صافی جهت تبخیر آهسته در دمای محیط قرار گرفت. پس از یک روز، بلورهای شفاف بنفش رنگی تشکیل شد. مقدار کل فرآورده (شامل رسوب و بلور) ۶۴/۵ میلی‌گرم بوده و بازده آن برپایه لیگاند پیریدین-۶،۲- دی‌کربوکسیلیک اسید ٪ ۳۴/۸۶ بدست آمد. دمای ذوب بلور ۱۸۷ درجه سانتیگراد اندازه‌گیری شد که با دمای ذوب رسوب یکسان بود. مقدار عناصر موجود در بلور و رسوب ترکیب مورد بررسی بدست آمده از روش تجزیه عنصری CHNS به ترتیب عبارتند از: کربن ۴۱/۲۳ و ۴۱/۴۴ ، هیدروژن ۳/۳۰ و ۳/۴۳ و نیتروژن ۱۴/۸ و ۱۵/۱۷ درصد.

همچنین داده‌های طیفی FT-IR عبارتند از: ۶۸۹(s)، ۷۶۷(s)، ۸۴۹(s)، ۸۹۱(s)، ۹۳۵(s)، ۱۰۲۳(s)، ۱۰۷۹(s)، ۱۰۶۹(s)، ۱۲۵۳(s)، ۱۳۸۱(s)، ۱۴۹۱(s)، ۱۶۰۶(s) و Cm^{-1} ۲۹۵۷(s).

بحث و نتیجه‌گیری

ساختار مولکولی ترکیب $(AdH^{+})[Cr(pydc)_2](H_2pydc).4H_2O$ (**۱**) در شکل ۲ نشان داده شده است. ترکیب مورد بررسی در سیستم بلوری راستگوشی و گروه فضایی *Pbca* متبلور شده و مقدار *R* نهایی برای ۲۵۲۳ بازتاب مستقل ۰/۰۵۳ است. پارامترهای یاخته آن (۱۴) *a*=۱۴/۱۸۰ (۱۲)، *b*=۱۳/۰۳۶ (۳)، *c*=۳۳/۹۸ آنگستروم و زوایا ۹۰ درجه هستند. داده‌های بلورشناسی ترکیب مورد بررسی در جدول ۱ ارایه شده‌اند.

واحد بی‌تقارن از سه جزء آنیونی، کاتیونی و خنثی تشکیل شده است (شکل ۲). جزء آنیونی کمپلکسی از یون Cr(III) است که دو واحد پیریدین-۶،۲-دی‌کربوکسیلات به شکل سه دندانه به فلز کوئوردینه شده‌اند و جزء کاتیونی یک مولکول آدنین پروتونه شده در جایگاه N1 (شکل ۱) است. جزء خنثی شامل یک واحد مولکول پیریدین-۶،۲-دی‌کربوکسیلیک اسید و چهار واحد مولکول آب تبلور است. با کئوردینه شدن دو لیگاند پیریدین-۶،۲-دی‌کربوکسیلات ($pydc^{-2}$) به فلز Cr(III) کمپلکس فلزی دارای بار الکتریکی ۱- است و از طرفی آدنین با دریافت یکی از هیدروژن‌های اسیدی جدا شده بر نیتروژن N1 خود با بار الکتریکی ۱+ نقش موازنه کننده‌ی بار در ساختار بلوری ترکیب مورد بررسی را بر عهده دارد. فضای کئوردیناسیونی با همارایی ۶ اطراف یون فلزی Cr(III) در کمپلکس فلزی ترکیب مورد بررسی نتیجه اتصال سه دندانه دو لیگاند پیریدین-۶،۲-دی‌کربوکسیلات از طریق چهار اکسیژن O1، O4، O6 و O7 و دو نیتروژن N1 و N2 به یون فلزی است. در مجموع، زاویه N1-Cr-N2 برابر با ۱۷۷/۶۴ درجه و دو زاویهٔ تقریباً عمود O4-Cr-O6 و O1-Cr-O7 به ترتیب برابر با ۹۱/۸۳و ۹۰/۶۳ درجه و مجموع زاویه‌های O4-Cr-O7، O1-Cr-O6، O1-Cr-O4 و O6-Cr-O7 بیشتر از ۳۶۰ درجه در کمپلکس فلزی Cr(III) تایید کننده هندسه کوئوردیناسونی هشت وجهی انحراف یافته در کمپلکس فلزی ساختار ترکیب مورد بررسی هستند. طول پیوند و زاویه‌های مهم در جدول ۲ گردآوری شده است.



شکل۲ ساختار ORTEP ترکیب **۱** (مولکول‌های آب برای وضوح بهتر نشان داده نشده‌اند).

[DOI: 10.29252/ijcm.27.2.459]

[DOI: 10.29252/ijcm.27.2.459]

جدول ۱ داده‌های بلورشناسی ترکیب **۱** در دمای اتاق

فرمول	$C_{26} H_{25} Cr N_8 O_{16}$
وزن مولکولی(گرم بر مول)	۷۵۷٫۵۴
سیستم بلوری	راستگوشی
گروه فضایی	*Pbca*
a (آنگستروم)	*a*=۱۴٫۱۸۰ (۱۴)
b (آنگستروم)	*b*=۱۳٫036 (12)
c (آنگستروم)	*c*=۳۳٫۹۸ (۳)
$\alpha = \beta = \gamma$ (درجه)	۹۰
حجم یاخته یکه (آنگستروم مکعب)	۶۲۸۲(۱۰)
تعداد واحد فرمولی در یاخته یکه	۸
چگالی (میلی‌گرم بر سانتی‌متر مکعب)	۱٫۵۷۶
شاخص R_1	۰٫۰۵۳
شاخص R_2 (WR_2)	۰٫۱۳۱
R_{int}	۰٫۰۷۵
شاخص نیکویی برازش	۱٫۰۶۷
تعداد بازتاب های مستقل	۲۵۲۳

جدول۲ پیوندها و زوایه‌های انتخابی ترکیب **۱.**

طول پیوند (آنگستروم)			
N1-Cr	۱٫۹۸۴(۵)	O4-Cr	۲٫۰۲۴(۴)
N2-Cr	۱٫۹۷۶(۵)	O6-Cr	۲٫۰۱۳(۴)
O1-Cr	۱٫۹۹۴(۴)	O7-Cr	۲٫۰۰۲(۴)
زاویه پیوند (درجه)			
N2-Cr-N1	۱۷۷٫۶۶(۱۷)	N2-Cr-O6	۷۸٫۶۰(۱۶)
N2-Cr-O1	۱۰۳٫۶۵(۱۶)	N1-Cr-O6	۱۰۰٫۵۲(۱۵)
N1-Cr-O1	۷۸٫۵۵(۱۶)	O1-Cr-O6	۹۳٫۹۱(۱۵)
N2-Cr-O7	۷۸٫۶۹(۱۶)	O7-Cr-O6	۱۵۷٫۲۸(۱۶)
N1-Cr-O7	۱۰۲٫۲۰(۱۶)	N2-Cr-O4	۹۹٫۵۱(۱۵)
O1-Cr-O7	۹۰٫۶۴(۱۵)	N1-Cr-O4	۷۸٫۳۶(۱۶)
O1-Cr-O4	۱۵۶٫۸۱(۱۶)	O7-Cr-O4	۹۲٫۶۷(۱۵)
O6-Cr-O4	۹۱٫۸۴(۱۵)		

زاویه‌های داخلی نیتروژن‌های پروتونه شده N1 و N9 در آدنین پروتونه شده در ساختار ترکیب مورد بررسی برای زاویه‌های C24-N6-C25 و C22-N8-C26 به‌ترتیب برابر با ۱۰۷٫۱۲و ۱۲۳٫۱۱ درجه و مشابه حالت توتومری N1-H آدنین و زاویه‌های داخلی نیتروژن‌های N3 و N7 برای زاویه‌های C25-N5-C26 و C23-N7-C24 به‌ترتیب برابر با ۱۰۳٫۳۲و ۱۱۱٫۹۵ درجه و مشابه حالت خنثی در آدنین است (شکل ۲) [۱۱].

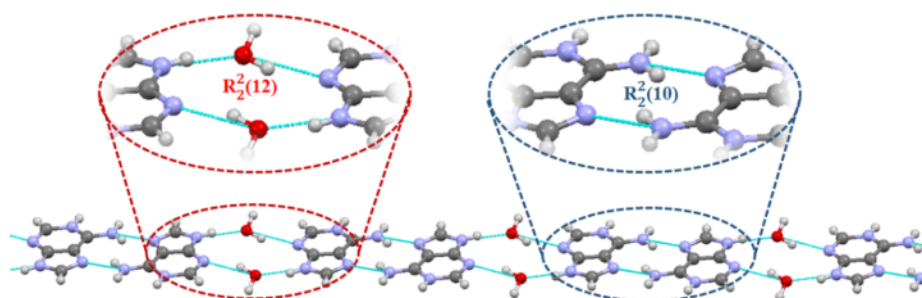
در ترکیب مورد بررسی، هرکاتیون آدنین از طریق پیوندهای هیدروژنی N4U-H4BU…N5 و N4-H4B…N5U و جفت شدن بازی وجه هاگستین[1] خود با کاتیون آدنین معادل خود در شبکه تشکیل سینتن $R_2^2(10)^2$ را می‌دهد. هر یک از این جفت‌های کاتیونی آدنین از طریق پیوندهای هیدروژنی N6-H6…O13 و O13-H131…N7 و

1- Hoogsteen face

[DOI: 10.29252/ijcm.27.2.459]

وجه قند خود به واسطه دو مولکول آب و تشکیل سینتن $R_2^2(12)^2$ به طور متناوب با هم در ارتباط بوده و نوارهای سوپرامولکولی جالبی از کاتیون‌های آدنین و مولکول‌های آب تشکیل می‌دهند (شکل ۳). سرانجام نوارهای سوپرامولکولی آدنین–آب از طریق وجه واتسون-کریک کاتیون‌های آدنین خود و با تشکیل پیوندهای هیدروژنی N8-H8…O12 و N4-H4A…O6 به ترتیب با پیریدین-۲،۶-دی‌کربوکسیلیک اسید خنثی و جزء آنیونی کمپلکس فلزی مجاور در ارتباط هستند.

باتوجه به جدول ۳، قوی‌ترین پیوند هیدروژنی ساختار مورد بررسی، پیوند O14-H141…O15[iii] با زاویه ۱۷۱ درجه و طول پیوند ۱٫۷۸ آنگستروم و مربوط به پیوند هیدروژنی بین دو مولکول آب تبلور و ضعیفترین پیونده هیدروژنی، پیوند C12-H12…O5[iv] با زاویه ۱۵۱ درجه و طول پیوند ۲٫۶۶ آنگستروم و مربوط به پیوند هیدروژنی بین دو کمپلکس فلزی مجاور است.



شکل ۳ توالی آدنین و مولکول‌های آب و سینتن‌های موجود در نوارهای سوپرامولکولی آدنین–آب در ترکیب **۱**.

جدول ۳ طول و زاویه‌های پیوند هیدروژنی ترکیب **۱**.

D-H…A	D-H(Å)	H…A(Å)	D…A(Å)	D-H…A >
C3-H3…O3[i]	۰٫۹۳	۲٫۵۷	۳٫۴۸۴(۷)	۱۶۷
C5-H5…O2[ii]	۰٫۹۳	۲٫۲۵	۳٫۱۲۲(۷)	۱۵۶
C10-H8…O8[iii]	۰٫۹۳	۲٫۴۱	۳٫۱۸۶(۷)	۱۴۱
C12-H12…O5[iv]	۰٫۹۳	۲٫۶۶	۳٫۴۹۸(۷)	۱۵۱
C24-H24…O9[v]	۰٫۹۳	۲٫۴۴	۳٫۲۰۷(۸)	۱۴۰
N4-H4A…O6[iv]	۰٫۸۶	۲٫۱۴	۲٫۸۵۴(۶)	۱۴۰
N4-H4B…N5[vi]	۰٫۸۶	۲٫۱۴	۲٫۹۴۷(۷)	۱۵۵
N6-H6…O13	۰٫۸۶	۱٫۸۷	۲٫۷۱۷(۶)	۱۶۸
N8-H8…O12	۰٫۸۶	۱٫۹۴	۲٫۷۴۴(۶)	۱۵۵
O10-H10A…O4	۰٫۸۲	۱٫۸۷	۲٫۶۴۹(۵)	۱۵۸
O11-H11A…O14	۰٫۸۲	۱٫۷۳	۲٫۵۴۰(۶)	۱۶۹
O13-H131…N7[vii]	۱٫۰۰(۱)	۲٫۰۲(۲)	۲٫۹۶۰(۷)	۱۵۷(۳)
O13-H132…O15[v]	۱٫۰۰(۱)	۲٫۰۳(۲)	۲٫۹۹۴(۷)	۱۶۱(۴)
O14-H141…O15[iii]	۱٫۰۰(۱)	۱٫۷۸(۱)	۲٫۷۷۱(۷)	۱۷۱(۴)
O14-H142…O1[viii]	۱٫۰۰(۱)	۱٫۹۸(۱)	۲٫۹۶۷(۶)	۱۶۸(۳)
O14-H142…O2[viii]	۱٫۰۰(۱)	۲٫۴۲(۴)	۳٫۰۷۹(۶)	۱۲۳(۳)
O15-H151…O8	۱٫۰۰(۱)	۱٫۸۳(۱)	۲٫۸۱۶(۶)	۱۶۸(۳)
O15-H152…O16	۱٫۰۰(۱)	۱٫۷۴(۱)	۲٫۷۰۵(۷)	۱۶۱(۳)
O16-H161…O3[ix]	۱٫۰۰(۱)	۱٫۹۱(۱)	۲٫۸۸۱(۷)	۱۶۵(۳)
O16-H162…O5[x]	۱٫۰۰(۱)	۱٫۹۳	۲٫۸۹۲(۶)	۱۶۱(۳)

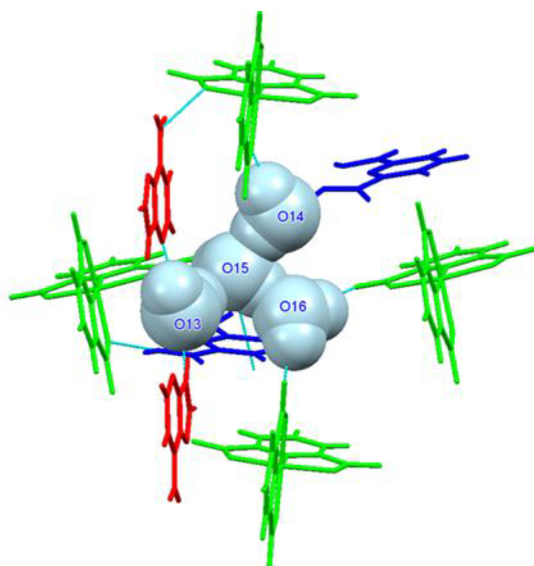
کدهای تقارنی برای تولید اتم‌های معادل:

(i) x+1/2, -y+3/2, -z+2; (ii) x-1/2, -y+3/2, -z+2; (iii) -x+1, y+1/2, -z+3/2; (iv) -x+1, y-1/2, -z+3/2; (v) -x+1/2, -y+1, z-1/2; (vi) -x+1, -y+1, -z+1; (vii) -x, -y+1, -z+1; (viii) x-1/2, y, -z+3/2; (ix) -x+1/2, y-1/2, z; (x) x, y-1, z.

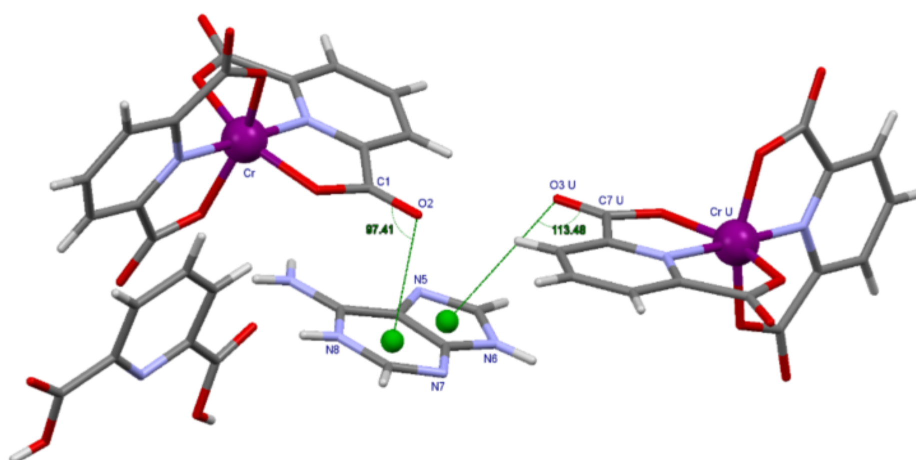
هر یک از مولکول‌های آب موجود در نوارهای سوپرامولکولی آدنین-آب از طریق پیوند هیدروژنی O13-H132…O15 با یک مولکول آب که آن نیز به نوبه خود با دو مولکول آب دیگر (از طریق پیوندهای هیدروژنی O15-H152…O16 و O14-H141…O15) در ارتباط است، تشکیل تترامرهای آب در ساختار ترکیب مورد بررسی را می‌دهند. در واقع تترامرهای آب با برقراری پیوندهای هیدروژنی متعدد بین اجزاء کاتیونی، آنیونی و خنثی در شبکه بلوری نقش مهمی را در رشد و تشکیل ساختار خود انباشته منسجم ترکیب **۱** ایفا می‌کنند (شکل ۴).

در ترکیب **۱**، دو برهم‌کنش C=O…π میان دو گروه C=O (C1-O2) و (C7-O3) حلقه‌های پیریدینی ($pydc^{2-}$) کمپلکس‌های فلزی به ترتیب با حلقه پیریمیدینی (۹۷٫۴۱ درجه) و ایمیدازولی (۱۱۳٫۴۸) آدنین مجاور برقرار است. شکل ۵ برهم‌کنش‌های C=O…π و زوایای برهم‌کنش‌ها را نشان می‌دهد.

در سرانجام کاتیون‌های آدنین با قابلیت برقراری پیوندهای هیدروژنی متنوع و جالب سبب برقراری ارتباط بین اجزای مختلف آنیونی، خنثی و تترامرهای آب شده و نقش مهمی را در گسترش ساختار بلوری ترکیب مورد بررسی ایفا می‌کنند. ساختار انباشته ترکیب $(AdH^+)[Cr(pydc)_2]$ $(H_2pydc).4H_2O$ (**۱**) در شکل ۶ دیده می‌شود.

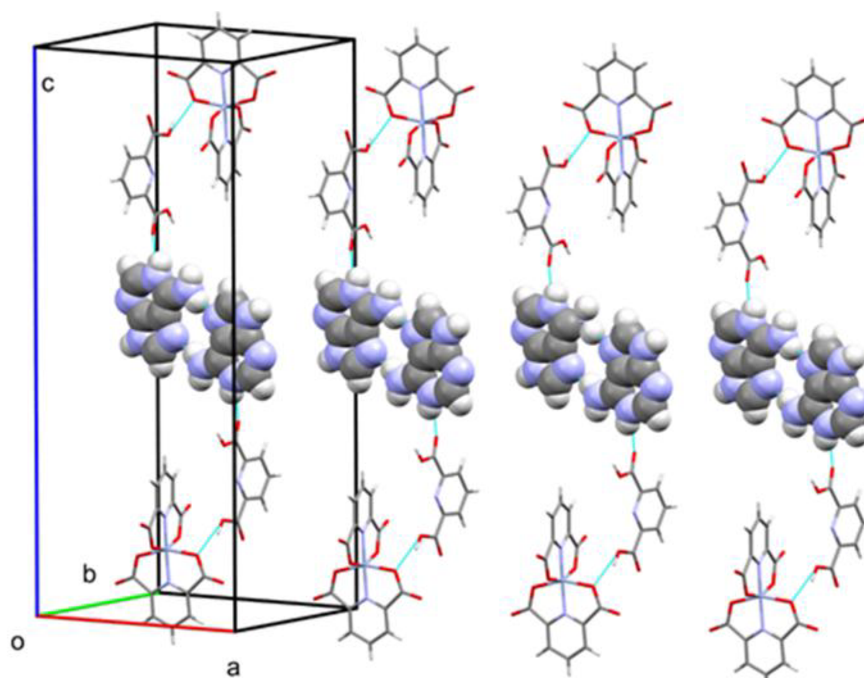


شکل ۴ تترامر آب و ارتباط مولکول‌های آب با اجزاء آنیونی (کمپلکس فلزی به رنگ سبز)، کاتیونی (آدنین به رنگ قرمز) و خنثی (پیریدین-۲،۶-دی‌کربوکسیلیک اسید به رنگ آبی تیره) در ترکیب **۱**.



شکل ۵ برهم‌کنش‌های C=O…π در ترکیب **۱**.

[DOI: 10.29252/ijcm.27.2.459]



شکل ۶ ساختار انباشته ترکیب **۱** (پیوندهای هیدروژنی با نقطه‌چین مشخص شده‌اند).

برداشت

ترکیب سوپرامولکولی، $(AdH^+)[Cr(pydc)_2](H_2pydc).4H_2O$، از روش انتقال پروتون تهیه شد و ساختار آن با استفاده از پراش پرتوی X، راستگوشی با گروه فضایی *Pbca* مشخص شد. واحد بی تقارن ساختار شامل یک کمپلکس فلزی آنیونی از فلز کرم (III)، یک مولکول آدنین پروتونه همراه با یک واحد خنثی پیریدین-۶،۲-دی کربوکسلیک اسید و ۴ مولکول آب تبلور است. در حالی‌که بررسی پیوندهای هیدروژنی متعدد آدنین از طریق وجوه مختلف واتسون-کریک، هاگستین و قند آن یکی از نکات جالب‌توجه و مهم در درک ساختار موجود است، پیوندهای هیدروژنی تترامرهای آب و انباشتگی‌های $C=O...\pi$ نیز از عوامل موثر در رشد ساختار سوپرامولکولی ترکیب مورد بررسی در سه بعد هستند.

مراجع

[1] Solov'ev V. P., Tsivadze A. Y., "*Supramolecular complexes: Determination of stability constants on the basis of various experimental methods*." Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces 51 (2015): 1-35.

[2] Toma H. E., Araki K., "*Supramolecular assemblies of ruthenium complexes and porphyrins*", Coordination Chemistry Reviews 196 (2000): 307-329.

[3] Beletskaya I., Tyurin V. S., Tsivadze A. Y., Guilard R., Stern C., "*Supramolecular chemistry of metalloporphyrins*." Chemical reviews 109 (2009): 1659-1713.

[4] Lindsey J. S., "*Self-assembly in synthetic routes to molecular devices. Biological principles and chemical perspectives: a review*." ChemInform 22, (1991): 153-179.

[5] Chi X., Guerin A. J., Haycock R. A., Hunter C. A., Sarson L. D., "*The thermodynamics of self-assembly*." Journal of the Chemical Society, Chemical Communications 24 (1995): 2563-2565.

[6] Yin H., Zhou Y., Ma Q., Ai S., Ju P., Zhu L., Lu L., "*Electrochemical oxidation behavior of guanine and adenine on grapheme-Nafion composite film modified glassy carbon electrode and the simultaneous determination*." Process Biochemistry 45, no. 10 (2010): 1707-1712.

[7] Verma S., Mishra A. K., Kumar J., "*The many facets of adenine: coordination, crystal patterns, and catalysis*." Accounts of chemical research 43, (2009): 79-91.

[8] Marzotto A., Ciccarese A., Clemente D. A., Valle G., "*Co-ordination chemistry of adenine (HAde): synthesis and characterization of [CuII (tren)(nucleobase)] X2 [tren= tris-(2-aminoethyl)*

[DOI: 10.29252/ijcm.27.2.459]

amine, X= Cl or NO_3] complexes and crystal structure of [CuII(tren)(Ade)]Cl·$2H_2O$." Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions 9 (1995): 1461-1468.

[9] Sheldrick G. M., *"SHELXTL Version 2014/7." Programs for the determination of small and macromolecular crystal structures by single crystal X-ray and neutron diffraction*" University of Göttingen Germany. URL http://shelx. uni-ac. gwdg. de/SHELX/index. php (2014).

[10] Macrae C. F., Bruno I. J., Chisholm J. A., Edgington P. R., McCabe P., Pidcock E., Wood P. A., "*Mercury CSD 2.0-new features for the visualization and investigation of crystal structures.*" Journal of Applied Crystallography 41 (2008): 466-470.

[11] Tamilselvi D., Muthiah P. T., "*Supramolecular patterns in benzyladeninium p-toluenesulfonate*." Acta Crystallographica Section C: Crystal Structure Communications 67.5 (2011): o192-o194.

[DOI: 10.29252/ijcm.27.2.459]